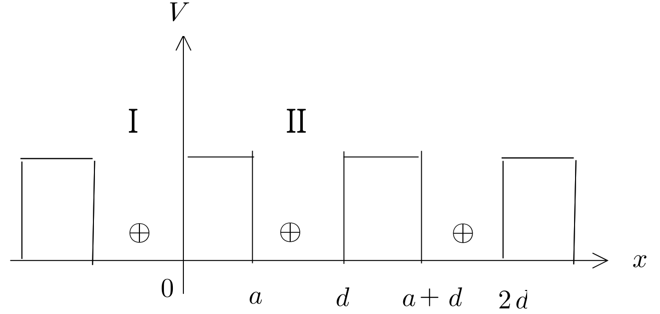
5.5 주기적인 위치에너지 - 블로호 함수와 에너지 띠

(Periodic Potential - Bloch Wave Function and Energy Band)

다음과 같이 주기가 d인 주기적인 위치에너지를 생각해 보자.

$$V(x+d)=V(x)$$



이와 같은 주기적인 위치에너지를 우리는 크로니-페니(Kronig-Penny) 위치에너지라고 부른다. 이처럼 주기적인 위치에너지를 갖는 계의 파동함수는 다음과 같이 블로호 파동함수(Bloch wave function)로 표현할 수 있다.

$$\phi(x)=e^{iKx}u(x)$$

여기서 K는 상수이고, 함수 $u(x)$는 주기 d의 주기함수이다. $u(x+d)=u(x)$

우리는 위의 관계를 블로호 정리(Bloch's theorem)라고 하는데, 이제 이를 증명해 보자.

먼저 함수를 d만큼 이동시키는 변위연산자(displacement operator) $\hat{D}$을 정의하자.

$$\hat{D}f(x)=f(x+d)$$

그런데 위치에너지는 이러한 변위연산자의 작용에 불변이므로

$$\hat{D}\,V(x)=V(x+d)=V(x)$$

해밀토니안 $H=\dfrac{P^2}{2m}+V(x)$는 변위연산자 $\hat{D}$와 서로 가환이다.

$$[\hat{D},H]=0$$

위의 연산자 관계식은 임의의 함수 $\psi(x)$에 대해서 $\hat{D}H\psi(x)=H\hat{D}\psi(x)$의 관계가 성립하는데서 나왔고, 우리가 앞서 배운 바와 같이 서로 가환인 변위연산자 $\hat{D}$와 해밀토니안 H는 공통의 고유함수를 가진다.

그러므로 이제 우리는 변위연산자 $\hat{D}$의 고유함수를 생각해보도록 하자.

한편, 위의 블로호 정리에서 주어진 파동함수는 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\phi(x+d)=e^{iK(x+d)}u(x+d)=e^{iKd}\,e^{iKx}u(x)=e^{iKd}\phi(x)$$

이는 변위연산자 $\hat{D}$가 블로호 파동함수에 다음과 같이 작용함을 보여준다.

$$\hat{D}\phi(x)=\phi(x+d)=e^{iKd}\phi(x)$$

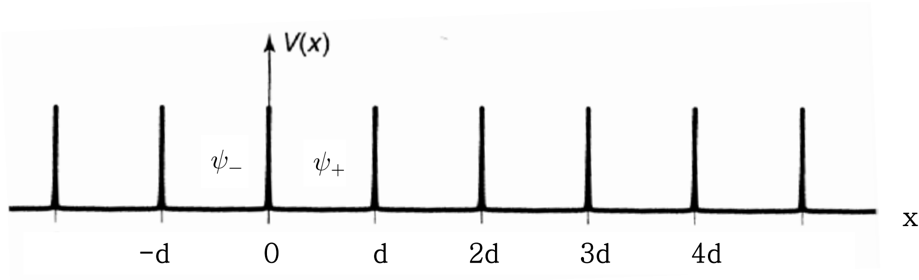
즉, 블로호 파동함수는 고유값이 e^{iKd}인 변위연산자 $\hat{D}$의 고유함수이다.

그러므로 블로호 파동함수는 주기적인 위치에너지를 갖는 해밀토니안의 고유함수가 되어 블로호 정리가 성립됨을 알 수 있다.

여기에서 K는 상수로 주어졌는데, 만약 파동함수가 주기적인 경계조건을 만족한다면,

예컨대 $\phi(x+Nd)=\phi(x)$를 만족한다면, $K=\dfrac{2\pi m}{Nd}$, $m=$정수 가 됨을 알 수 있다.

이제 블로호 정리의 간단한 적용을 위하여 주기적인 델타 함수들로 주어지는 위치에너지를 생각해 보자.



$$V(x) = \lambda \sum_{j=-\infty}^{\infty} \delta(x + jd)\,, \quad \lambda > 0$$

위에 주어진 위치에너지는 $V(x+d) = V(x)$의 관계를 만족하므로 우리는 블로호 정리를 적용할 수 있다.
먼저, $-d \le x \le 0$의 영역I 에서의 파동함수를 $\psi_-(x)$라고 하고, $0 \le x \le d$의 영역II 에서의 파동함수를 $\psi_+(x)$라고 하면, 블로호 정리에 의하여 두 함수는 다음의 관계를 만족한다.
블로호 정리는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\phi(x) = e^{-iKd}\phi(x+d)$$

여기서 x가 영역I 에 위치한다면, $x+d$는 영역 II 에 위치하여, 위식은 다음과 같이 된다.

$$\psi_-(x) = e^{iKd}\psi_+(x+d) \quad \text{---(1)}$$

한편 $0 < x < d$ 영역에서 위치에너지는 영이므로 우리는 이 영역에서의 파동함수를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_+(x) = A\sin kx + B\cos kx \ , \ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

그러면 위의 (1)번 식에서
$\psi_-(x) = e^{-iKd}[A\sin k(x+d) + B\cos k(x+d)]$ 로 주어진다.
앞에서 공부한 델타 함수 위치에너지의 경우에서 우리는 $x=0$에서의 경계조건이 다음과 같이 주어짐을 알 수 있다.

$$\psi_-(0) = \psi_+(0) \quad \text{---(2)}$$

$$\psi_+'(0) - \psi_-'(0) = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda\psi(0) \quad \text{---(3)}$$

위 경계조건들을 다음과 같이 표현된다.

$$B = e^{-iKd}(A\sin kd + B\cos kd) \quad \text{-----(4)}$$

$$Ak - e^{iKd}[Ak\cos kd - Bk\sin kd] = \frac{2m}{\hbar^2}\lambda B \quad \text{----(5)}$$

여기서 $\frac{2m}{\hbar^2}\lambda \equiv \beta$ 라고 놓으면 위 식들은 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$B(e^{iKd} - \cos kd) = A\sin kd \quad \text{--- (6)}$$

$$[\beta - e^{-iKd}k\sin kd]B = [k - e^{-iKd}k\cos kd]A \quad \text{--- (7)}$$

이제 (6)번 식을 (7)번 식에 대입하면 우리는 다음 관계식을 얻는다.

$$\beta \sin kd + 2k \cos kd = k(e^{iKd} + e^{-iKd}) = 2k \cos Kd$$

이제 $\dfrac{\beta d}{2} = \dfrac{m\lambda d}{\hbar^2} \equiv \gamma > 0$, $kd \equiv z$ 로 놓으면, 위 식은 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\cos Kd = \cos z + \gamma \frac{\sin z}{z} \quad \text{----} \quad (8)$$

여기서 (8)식의 우변을 $f(z) \equiv \cos z + \gamma \dfrac{\sin z}{z}$ 로 놓으면, 에너지 E 는 함수 $f(z)$ 가 $\cos Kd$ 값이 되는 점에서의 k 값에 의하여 결정된다 ($E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$).

그런데 $-1 \le \cos Kd \le 1$ 이므로 해를 갖는 z 의 범위는 국한되게 된다.

아래의 그림에서 해는 z 축에서 굵은 선으로 표시된 부분에서만 가능하며, 이 영역들은 허용된 에너지 띠(allowed energy bands)로 나타난다. z 의 나머지 영역은 해가 존재할 수 없으므로 우리는 이에 해당하는 에너지 영역을 금지된 에너지 띠(forbidden energy bands)라고 부른다.

